

Міністерство освіти і науки України  
Львівський національний університет імені Івана Франка

**Л. АКСЕЛЬРУД, Р. ГЛАДИШЕВСЬКИЙ**

# **СИМЕТРІЯ 6D МОДУЛЬОВАНИХ СТРУКТУР**

Монографія

У чотирьох частинах

**Частина 3**

Львів  
ЛНУ імені Івана Франка  
2021

УДК 548.736

А 42

**Рецензенти:**

д-р хім. наук, проф. *Л. О. Василечко*  
(Національний університет “Львівська політехніка”);  
д-р *П. Ю. Завалій*  
(Університет Меріленду, Вашингтон)

*Рекомендовано до друку Вченою радою  
Львівського національного університету імені Івана Франка  
Протокол № 21/11 від 3 листопада 2021 р.*

**Аксельруд Л.**

**А 42** Симетрія 6D модульованих структур : монографія : у 4 ч. Ч. 3 / Л. Аксельруд, Р. Гладішевський. – Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2021. – 596 с.

ISBN 978-617-10-0693-5

ISBN 978-617-10-0696-6 (Ч. 3)

Монографія містить повні таблиці надпросторових груп для 6D модульованих структур з операціями симетрії та систематичними погашеннями для встановлення надпросторової групи з експериментальних даних. Ці характеристики є важливою складовою дослідження реальних модульованих кристалічних структур. У таблицях наведено 3313 6D надпросторових груп для 75 вихідних символів 3D просторових груп (ромбічна та тетрагональна сингонії, №№ 65-127).

Для дослідників у галузі кристалографії, кристалохімії та хімії і фізики твердого тіла.

УДК 548.736

ISBN 978-617-10-0693-5

ISBN 978-617-10-0696-6 (Ч. 3)

© Аксельруд Л., Гладішевський Р., 2021

© Львівський національний університет  
імені Івана Франка, 2021

## Зміст

Номер	Символи Hermann-Mauguin	Hall	Стор.	Номер	Символи Hermann-Mauguin	Hall	Стор.
65	Cmmm	-C 2 2	6	82	I-4	I-4	361
65: cab	Ammm	-A 2 2	63	83	P4/m	-P 4	362
65: bca	Bmmm	-B 2 2	80	84	P4 <sub>2</sub> /m	-P 4c	364
66	Cccm	-C 2 2c	97	85	P4/n	-P 4a	366
66: cab	Amaa	-A 2a 2	113	86	P4 <sub>2</sub> /n	-P 4bc	368
66: bca	Bbmb	-B 2b 2b	119	87	I4/m	-I 4	369
67	Cmma	-C 2b 2	123	88	I4 <sub>1</sub> /a	-I 4ad	370
67: cab	Abmm	-A 2c 2c	179	89	P422	P 4 2	371
67: bca	Bmcm	-B 2 2c	196	90	P4 <sub>2</sub> 12	P 4ab 2ab	380
68	Ccca	-C 2b 2bc	212	91	P4 <sub>1</sub> 22	P 4w 2c	383
68: cab	Abaa	-A 2a 2c	228	92	P4 <sub>1</sub> 212	P 4abw 2nw	386
68: bca	Bbcb	-B 2bc 2b	233	93	P4 <sub>2</sub> 22	P 4c 2	387
69	Fmmm	-F 2 2	237	94	P4 <sub>2</sub> 212	P 4n 2n	394
70	Fddd	F 2 2 -1d	285	95	P4 <sub>3</sub> 22	P 4cw 2c	396
71	Immm	-I 2 2	289	96	P4 <sub>3</sub> 212	P 4nw 2abw	399
72	Ibam	-I 2 2c	299	97	I422	I 4 2	400
72: bca	Icma	-I 2b 2b	305	98	I4122	I 4bw 2bw	404
72: cab	Imcb	-I 2a 2	309	99	P4mm	P 4 -2	407
73	Ibca	-I 2b 2c	322	100	P4bm	P 4 -2ab	421
74	Imma	-I 2b 2	331	101	P4 <sub>2</sub> cm	P 4c -2c	429
74: cab	Ibmm	-I 2c 2c	336	102	P4 <sub>2</sub> nm	P 4n -2n	436
74: bca	Imcm	-I 2 2a	349	103	P4cc	P 4 -2c	442
75	P4	P 4	354	104	P4nc	P 4 -2n	446
76	P4 <sub>1</sub>	P 4w	356	105	P4 <sub>2</sub> mc	P 4c -2	450
77	P4 <sub>2</sub>	P 4c	357	106	P4 <sub>2</sub> bc	P 4c -2ab	456
78	P4 <sub>3</sub>	P 4cw	358	107	I4mm	I 4 -2	460
79	I4	I 4	359	108	I4cm	I 4 -2c	466
80	I4 <sub>1</sub>	I 4bw	360	109	I4 <sub>1</sub> md	I 4bw -2	472
81	P-4	P -4	361	110	I4 <sub>1</sub> cd	I 4bw -2c	474

Номер	Символи Hermann-Mauguin	Hall	Стор.	Номер	Символи Hermann-Mauguin	Hall	Стор.
111	P-42m	P -4 2	476	120	I-4c2	I -4 -2c	510
112	P-42c	P -4 2c	484	121	I-42m	I -4 2	512
113	P-421m	P -4 2ab	487	122	I-42d	I -4 2bw	515
114	P-421c	P -4 2n	490	123	P4/mmm	-P 4 2	516
115	P-4m2	P -4 -2	491	124	P4/mcc	-P 4 2c	547
116	P-4c2	P -4 -2c	498	125	P4/nbm	-P 4a 2b	557
117	P-4b2	P -4 -2ab	501	126	P4/nnc	-P 4a 2bc	575
118	P-4n2	P -4 -2n	504	127	P4/mbm	-P 4 2ab	583
119	I-4m2	I -4 -2	507				

## Вступ

Для класичної кристалографії та кристалохімії, що базуються на симетрії 3-вимірних (3D) просторових груп [1], періодичність ґратки є фундаментальним поняттям. Натомість, багато реальних кристалів є аперіодичними – їхні структури характеризуються дальнім порядком без 3D трансляційної симетрії. Дослідження таких кристалів, відомих як модульовані і композитні структури та квазікристали, вимагає використання груп симетрії багатовимірних просторів (4D-6D). Модуляцію розглядають як періодичну деформуцію базової структури, що має симетрію 3D просторової групи. Якщо періодичність модуляції не можна описати періодичністю базової структури, то модульовану кристалічну структуру називають неспіввимірною.

Таблиці символів і спеціальних умов відбиттів (систематичних погашень) 4D (3+1D) надпросторових груп модульованих структур приведені в Міжнародних кристалографічних таблицях [2]. Відповідні таблиці для 5D та 6D модульованих структур були вперше укладені А. Ямамото [3], але були неповними і містили нестандартизовані символи 3D просторових груп, що ускладнювало їхнє використання. Недоліком цих таблиць також була відсутність переліку операцій симетрії та систематичних погашень для надпросторових груп зі змінним абрисом елементарної комірки. Удосконалені позначення надпросторових груп для 5D та 6D модульованих структур представлені в працях [4,5] і реалізовані на вебресурсі [6]. Доступна інформація містить лише символи надпросторових груп, а відповідні операції симетрії та систематичні погашення можуть бути одержані лише після додаткових розрахунків, що ускладнює використання ресурсу. Праця [7] містить повні таблиці 3332 5D надпросторових груп для 327 вихідних символів 3D просторових груп.

Монографія “Симетрія 6D модульованих структур” (Частина 3) містить таблиці надпросторових груп ромбічної та тетрагональної сингонії (№№ 65-127 3D просторових груп) для 6D модульованих структур з операціями симетрії, а також систематичними погашеннями, за якими надпросторова група може бути визначена з експериментальних даних. Для векторів модуляції прийняте основне стандартне формулювання згідно з Міжнародними кристалографічними таблицями: порядок компонентів  $\alpha, \beta, \gamma$  відповідно до напрямів X, Y, Z.

Для надпросторових груп моноклінної сингонії стандартними є установки з кутом моноклінності  $\gamma$ . Всі параметри одержані за допомогою програм, що є частиною пакету програм WinCSD [8].

У таблицях застосований такий порядок запису:

1. Номер і символ 3D просторової групи згідно з Міжнародними кристалографічними таблицями.
2. Символ 6D надпросторової групи, який включає символ 3D просторової групи базової структури та такі елементи:
  - а) три вектори модуляції ( $\alpha, \beta, \gamma$ ) за напрямками X, Y, Z;
  - б) символи додаткових трансляцій 0,  $s=1/2$ ,  $q=1/4, 3/4$ ,  $t=1/3, 2/3$ ,  $h=1/6, 5/6$  за четвертою, п'ятою та шостою координатами.
3. **Coordinates** – координати атомів у загальній правильній системі точок, які позначені символами x, y, z, t, p, q з частковими трансляціями.
4. **Reflection conditions** – умови відбиттів (систематичні погашення) за індексами Міллера hklmni 6D оберненого простору.
5. **Bravais vector(s)** – вектори Браве.

У таблицях (Частина 3) приведено 3313 6D надпросторових груп для 75 вихідних символів 3D просторових груп.

1. T. Hahn (Ed.), International Tables for Crystallography, Volume A – Space-Group Symmetry, Dordrecht: Kluwer, 2002, 911 p.
2. A.J.C. Wilson, E. Prince (Eds.), International Tables for Crystallography, Volume C – Mathematical, Physical and Chemical Tables, Dordrecht: Kluwer, 1999, 992 p.
3. <http://wcp-ar.eng.hokudai.ac.jp/yamamoto/>
4. H.T. Stokes, B.J. Campbell, S. van Smaalen, Acta Cryst. A, 2011, Vol. 67, P. 45-55.
5. S. van Smaalen, B.J. Campbell, H.T. Stokes, Acta Cryst. A, 2013, Vol. 69, P. 75-90.
6. <https://stokes.byu.edu/iso/ssg.php>
7. Л. Аксельруд, Р. Гладішевський, Симетрія 5D модульованих структур, Львів: ЛНУ ім. Івана Франка, 2020, 618 с.
8. L. Aksefud, Y. Grin, J. Appl. Cryst., 2014, Vol. 47, P. 803-805.

Наукове видання

**АКСЕЛЬРУД Лев Григорович,  
ГЛАДИШЕВСЬКИЙ Роман Євгенович**

# **СИМЕТРІЯ 6D МОДУЛЬОВАНИХ СТРУКТУР**

Монографія

У чотирьох частинах

**Частина 3**

Формат 60x84/8. Ум. друк. арк. 69,3. Тираж 100 пр. Зам.

Видавець та виготовлювач:  
Львівський національний університет імені Івана Франка.  
*вул. Університетська, 1, м. Львів, 79000.*

Свідоцтво про внесення суб'єкта видавничої справи  
до Державного реєстру видавців, виготівників  
і розповсюджувачів видавничої продукції.  
Серія ДК №3059 від 13.12.2007 р.